



TITLE:

2.球状タンパク質のNMRにおける  
緩和時間 $T_1$ の基準振動解析による  
計算(九州大学理学部物理学科,修士  
論文題目・アブストラクト(1987年  
度)その2)

AUTHOR(S):

入佐, 正幸

---

CITATION:

入佐, 正幸. 2.球状タンパク質のNMRにおける緩和時間 $T_1$ の基準振動解析による計算(九州大学理学部物理学科,修士論文題目・アブストラクト(1987年度)その2). 物性研究 1988, 50(6): 1119-1120

ISSUE DATE:

1988-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93275>

RIGHT:

## 1. 軌道拡大率の揺らぎによる間欠性カオスの特徴づけ

小 林 達 治

乱流の  
奥底ひそむ  
カオスには  
 $q$ -相転移  
においぬるかな

カオスの予測不可能性は、二つの密接した軌道間の距離の指数関数的拡大のために生じている。そのため、この距離の対数の時間平均である軌道拡大率と、その長時間平均であるリャプノフ数は重要な量である。

ところで、カオスは、コイン投げと同じ程度のデタラメな時系列を生成するが、その内部には多くの秩序が内在している。

今回、 $q$ というパラメーターを導入し、 $q$ 乗の重みをつけて平均することにより、軌道拡大率の揺らぎを考えることが可能になった。特に、カオスの構造変化点では、軌道拡大率の $q$ の重みつき平均  $A(q)$ にとび ( $q$ -相転移)が生じ、カオスに含まれる特徴的な構造を分離して捉えられた。このことを間欠性カオスを示す1次元写像を例に取り示した。

## 2. 球状タンパク質のNMRにおける緩和時間 $T_1$ の基準振動解析による計算

入 佐 正 幸

小さな球状タンパク質 Bovine Pancreatic Tripsin Inhibitor (BPTI) の4つのフェニルアラニンの  $C^\alpha$  のNMRの実験における縦緩和時間 ( $T_1$ ) を計算し実験と比較した。タンパク質の内部運動については、我々の研究室で開発された基準振動解析を用いた。外磁場25

MHz における  $T_1$  の平均値は、我々の計算では 500 ms、実験では 527 ms となった。 $T_1$  の計算ではタンパク質の内部運動を全く考慮しない場合に比べ、5% の増加がみられた。内部運動の計算には基準振動解析を用いているため非調和的な運動（例、ベンゼン環の 180 ring flip）は考慮されていないが、比較した NMR の  $T_1$  の実験は、非調和効果の影響を論じるだけの精度を持っていなかった。さらに、内部運動を直接表現している Generalized order parameter ( $S_j$ ) も計算し、Levy らの、Molecular Dynamics による計算と比較した。

### 3. 蛋白質立体構造計算アルゴリズム DADAS 法の方法手順改良

松 隈 純 滋

生体の重要な有機構成成分は、糖質、脂質、そして蛋白質の三つに大別される。しかし、これら三大栄養素の持つ生体における意義を考えると蛋白質だけは特殊な立場にある。糖質、脂質は身体の構成成分としての働きを持つが、本来の目的は、酸素と結合しエネルギーを発生させることである。蛋白質は、身体のうちで行われる様々な化学反応の進行、調整を行い、さらに異物に対する防御反応、運動、自己複製といった全ての生命の維持発展に不可欠の要素である。筋肉にはアクチン、ミオシンという蛋白質が存在し、腱、真皮、骨、及び軟骨には、コラーゲンという繊維状の蛋白質が含まれ、毛髪、表皮にはケラチンという硬い蛋白質が含まれている。蛋白質一分子は、20 数種のアミノ酸が一本の鎖状に結合したものであり、蛋白質の種類によりそのアミノ酸配列は異なっている。そして、その立体構造はそれぞれの蛋白質に特有のものとなっている。消化酵素やホルモンも蛋白質である。結合したアミノ酸の数が比較的に少ないため、一般的に立体構造は球状をしている。球状蛋白質の立体構造の細部を眺めてみると、その機能と立体構造の相関が浮かび上がってくる。蛋白質の立体構造を知ることは、蛋白質の機能発現のメカニズムを探るための大きな助けとなる。

ここ数年の間に、NMR を用いて蛋白質の溶液中の立体構造を決定できるようになってきた。それまでは、X線結晶解析法が唯一の立体構造決定法であった。NMR から得られる蛋白質分子中の原子間の距離の情報を基に立体構造を計算するアルゴリズムは distance geometry 法と呼ばれ、様々な方法が考え出されている。その中で最も成果をあげているのは郷 - Braun に